Classification supervisée en grande dimension. Application à l'agrément de conduite automobile

Jean-Michel Poggi & Christine Tuleau

Laboratoire de Mathématique – U.M.R. C 8628, "Probabilités, Statistique et Modélisation", Université Paris-Sud, Bât. 425, 91405 Orsay Cedex, France (et Univ. Paris 5)

jean-michel.poggi@math.u-psud.fr christine.tuleau@math.u-psud.fr

Résumé

Ce travail est motivé par un problème réel appelé l'objectivation. Il consiste à expliquer l'agrément de conduite au moyen de critères "physiques", issus de signaux mesurés lors d'essais. Nous suggérons une approche pour le problème de la sélection des variables discriminantes en tentant de tirer profit du caractère fonctionnel des données. Le problème est mal posé, au sens où le nombre de variables explicatives est très supérieur à la taille de l'échantillon. La démarche procède en trois étapes : un prétraitement des signaux incluant débruitage par ondelettes, recalage et synchronisation, une réduction de la taille des signaux par compression dans une base d'ondelettes commune, et enfin l'extraction des variables utiles au moyen d'une stratégie incluant des applications successives de la méthode CART.

Mots clés: CART, Classification, Discrimination, Ondelettes

Abstract

This work is motivated by a real world problem: objectivization. It consists of explaining the subjective drivability using physical criteria coming from signals measured during experiments. We suggest an approach for the discriminant variables selection trying to take advantage of the functional nature of the data. The problem is ill-posed, since the number of explanatory variables is hugely greater than the sample size. The strategy proceeds in three steps: a signal preprocessing, including wavelet denoising and synchronization, dimensionality reduction by compression using a common wavelet basis, and finally the selection of useful variables using a stepwise strategy involving successive applications of the CART method.

Key words: CART, Classification, Wavelets

1 Introduction

Ce travail est motivé par un problème réel appelé l'objectivation. Il consiste à expliquer l'agrément de conduite traduisant un confort ressenti relativement à une prestation donnée, par exemple le comportement de la boîte de vitesses lors de la phase de mise en mouvement d'un véhicule, au moyen de critères "physiques", c'est-à-dire de variables issues de signaux (comme une vitesse, des couples ou encore la position de pédales) mesurés

lors d'essais. Il s'agit d'utiliser cette quantification pour en tenir compte lors de la phase de conception du véhicule. Il s'inscrit dans la continuité de travaux menés par Renault portant sur la prestation décollage à plat pour un groupe moto-propulseur à boîte de vitesses robotisée (cf. Ansaldi [2]).

Dans cet article, nous développons une approche alternative pour le problème de la sélection des variables discriminantes en tentant de plus tirer profit du caractère fonctionnel des données. De ce point de vue, ce travail peut être rapproché de l'analyse des données fonctionnelles. Citons Deville [11], Dauxois et Pousse [10] pour les travaux pionniers dans les années 70. Plus récemment, on peut citer par exemple, Leurgans et al. [22], Hastie et al. [20] et ces dernières années, Ferraty, Vieu [15], Ferré et al. ([17], [16]), Rossi et Conan-Guez [27], Biau et al. [5] ainsi que le texte de synthèse de Besse, Cardot [4]. En outre les deux livres de Ramsay, Silverman [25], [26] constituent une ressource précieuse. Dans ce travail, nous préférons utiliser la méthode CART particulièrement adaptée pour la sélection de variables.

Comme cela est classique dans de nombreuses applications où les variables explicatives sont des courbes, le problème industriel qui nous occupe est mal posé, au sens où le nombre de variables explicatives est très supérieur à la taille de l'échantillon. L'un des exemples typiques de telles situations est fourni par les données d'expression du génome. On trouvera dans Dudoit et al. [13] la présentation de ce problème et de diverses méthodes de classification supervisée actuellement en compétition. On pourra aussi consulter Vannucci et al. [29] pour la situation où les variables explicatives sont des spectres, ce qui est classique en chimiométrie.

Structurellement le problème industriel qui nous intéresse présente une particularité supplémentaire : nous disposons non pas d'une seule variable explicative qui est une courbe mais d'un grand nombre de variables fonctionnelles parmi lesquelles il faut choisir les plus influentes. Notre approche s'intéresse donc à un double problème de sélection : celle des variables fonctionnelles d'une part, et d'autre part pour chacune de ces courbes, la sélection de bons descripteurs discriminants.

La démarche adoptée procède en trois étapes et utilise deux outils fondamentaux que sont d'une part la méthode des ondelettes (cf. Misiti et al. [24]) et d'autre part la méthode de classification non linéaire CART (cf. [7]). Les trois étapes sont constituées d'un prétraitement des signaux (incluant débruitage par ondelettes, recalage et synchronisation), d'une réduction de la dimension par compression dans une base d'ondelettes commune puis de l'extraction et sélection des variables utiles au moyen d'une stratégie incluant des applications successives de la méthode CART.

Le plan de l'article est le suivant. Après cette introduction, le paragraphe 2 présente le

contexte de l'application : le problème et les données. Dans le paragraphe 3, la démarche adoptée est détaillée. Enfin le paragraphe 4 regroupe quelques éléments de conclusion.

2 Le contexte applicatif

2.1 Le problème

La campagne d'essais réalisée par Renault (cf. Ansaldi [2]) a conduit à faire varier les facteurs suivants : le réglage de la boîte de vitesses, les conditions de roulage et les pilotes. Lors de ces essais, ont été mesurés d'une part l'agrément du pilote et d'autre part des données objectives consistant dans le relevé, à l'aide de capteurs, de plusieurs signaux temporels.

Précisons quelques éléments de terminologie utiles dans la suite. On appelle "produit" un élément de

```
 \{produits\} = \{conditions\ de\ roulage\} \times \{3\ r\'eglages\ de\ la\ boite\ de\ vitesses\}  où  \{conditions\ de\ roulage\} = \{2\ charges\} \times \{2\ angles\ p\'edale\} \times \{2\ vitesses\ p\'edale\}  ce qui conduit au plus à 24 produits (12 pour chacune des charges).
```

On appelle "essai" un élément de $\{essais\} = \{7 \ pilotes\} \times \{24 \ produits\}$ conduisant à un maximum de 168 essais.

Les essais à 140 kg de charge ont été menés séparément des essais à 280 kg de charge. Pour chaque charge, 6 produits parmi les 12 possibles ont été testés : 4 pilotes ont comparé par paires ces 6 produits. Après analyse des résultats, 114 essais à 140 kg et 118 essais à 280 kg ont été retenus. Chacun de ces essais est représenté par un ensemble de 21 variables fonctionnelles qui correspondent aux signaux mesurés par les capteurs durant l'expérience.

L'étude menée dans [2] s'articule autour de trois phases :

- l'association d'un agrément à chacun des produits.

 Pour chaque paire d'essais, le pilote précisait son essai préféré. A partir de ces données de comparaisons par paires et à l'aide d'une méthode inspirée du "multi-dimensional scaling" (voir la thèse de Favre [14]) sont obtenus un classement des produits par pilote et un agrément consensuel à toute la population des pilotes, par charge. Cet agrément associe à un produit un rang de satisfaction (le rang 1 étant celui du produit le plus apprécié);
- l'extraction de critères puis sélection par analyse discriminante. A partir des signaux mesurés, de très nombreux critères sont générés puis, au moyen

d'une analyse discriminante linéaire arborescente dite par moindres écarts (c'est-àdire basée sur un critère L^1), un petit nombre d'entre eux expliquant l'agrément, sont extraits;

• le calcul d'intervalles de tolérance.

Pour chacun des critères pertinents, un intervalle qui maximise l'agrément sous certaines contraintes sur les produits, est construit (ce point constitue d'ailleurs la contribution majeure de la thèse d'Ansaldi [2]).

On se concentre, dans cet article, sur la deuxième étape en utilisant une approche plus fonctionnelle. Bien sûr, on ne considère que les données issues de la phase 1 qui sont seules détaillées dans le paragraphe suivant. L'agrément est le rang consensuel attribué à chacun des 6 produits testés. Ceci conduit à un problème de discrimination, au lieu d'un problème de régression avec une variable à expliquer ordinale discrète.

Dans la suite, ne seront considérés que les essais à 140 kg de charge (pour les essais à 280 kg de charge, la démarche est identique et les résultats obtenus dans l'étude [2] sont semblables).

2.2 Les données

Les données sont constituées des couples $((X_i^j)_{1 \le j \le J}, Y_i)_{1 \le i \le n}$, où n = 114 et J = 21, et :

- Y_i représente le rang attribué au produit testé lors de l'essai i;
- X_i^j représente la $j^{\grave{e}me}$ variable fonctionnelle mesurée lors de l'essai i et est le signal $\{X_i^j(t)\}_{t\in T_i}$ où T_i est la grille temporelle régulière propre à l'essai i.

Autrement dit, pour chacun des essais, on dispose de l'agrément et de 21 signaux (on parlera dans la suite, suivant le contexte, de signaux comme de variables fonctionnelles ou encore de courbes) pour la plupart d'environ 1000 points (en fait ils comportent entre 600 et 5000 points). Ces variables fonctionnelles sont principalement des positions, des vitesses, des accélérations, des couples et des régimes moteur, cependant pour des raisons de confidentialité la nature des variables ne peut pas être indiquée de façon plus précise. Notons que la fréquence d'échantillonnage de 250 Hz est la même pour tous les essais et correspond à une haute résolution temporelle.

La distribution de l'agrément Y, après regroupement en 5 modalités, est donnée par les fréquences 33%, 17%, 18%, 15%. Seulement 5 modalités, et non 6, sont prises en considération, deux produits ayant obtenu le même agrément.

On trouve dans la Figure 1, les quatre variables fonctionnelles X^j correspondant à j=4, 14, 17, 22 pour les essais 7 et 19.

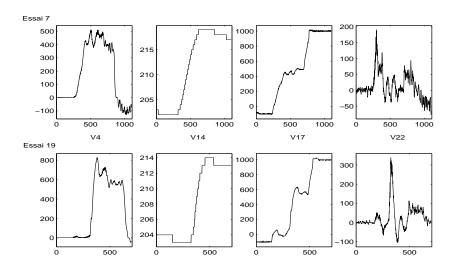


FIGURE 1 — Pour les essais 7 et 19, les quatre variables fonctionnelles X^j correspondant à j=4,14,17,22, notées simplement V4, V14, V17 et V22. Elles sont observées sur une grille temporelle propre à l'essai et présentent des caractéristiques temporelles variées.

L'examen des graphiques permet de formuler quelques remarques préliminaires concernant ces variables fonctionnelles :

- elles sont observées sur une grille temporelle propre à l'essai, ce qui nécessitera des recalages temporels;
- elles peuvent être d'allure générale et d'ordre de grandeur très différents, à la fois pour un même essai mais aussi au travers des différents essais, ce qui impliquera des recalages en ordonnée des courbes;
- elles présentent des caractéristiques temporelles très différentes, par exemple le rapport signal sur bruit, élevé en général, peut s'avérer modéré comme dans le cas de la variable 22 ou encore l'être localement comme c'est le cas pour ces quatre variables sauf la variable 14 qui est une fonction constante par morceaux. Il est clair qu'un débruitage, sans être en général crucial, peut s'avérer utile;
- la forme générale est souvent simple et peu de paramètres ou peu d'événements semblent suffisants pour la caractériser. Ceci permet d'espérer à la fois une ca-

ractérisation économe des variables fonctionnelles ainsi qu'une compression efficace.

Remarque 1

La variabilité, entre les essais, des durées d'observation et celle des amplitudes des signaux mesurés, résultent des différences de conditions de roulage et de l'exécution plus ou moins scrupuleuse des consignes par les pilotes.

3 La démarche

Le cadre général dans lequel on se place est celui de la sélection de variables dans un problème de discrimination, et consiste à construire une fonction, génériquement notée F dans la suite, pour prédire Y à l'aide de :

$$\hat{Y} = F(X^1, ..., X^J)$$

Dans cette perspective, il sera utile de sélectionner parcimonieusement les variables fonctionnelles qui peuvent expliquer l'agrément, puis pour chacune d'elles, de ne retenir qu'un très faible nombre d'aspects la décrivant, pour des raisons évidentes de robustesse.

Autrement dit, on cherche à sélectionner ce que nous appelons dans ce contexte, des critères notés C^{j_k} , déduits des X^j , de façon à prédire convenablement Y par :

$$\hat{Y} = F(C^{j_1}, ..., C^{j_K})$$

avec K << J, typiquement de l'ordre de 5 pour l'application industrielle.

Rappelons que dans le cadre de l'objectivation, il ne s'agit pas d'expliquer au mieux l'agrément en utilisant toutes les informations disponibles, comme par exemple les conditions de roulage, qui ont un impact certain, mais de l'expliquer partiellement en se restreignant exclusivement à des variables déduites des signaux mesurés de façon à pouvoir remonter à des paramètres de conception du véhicule.

La démarche adoptée procède en trois étapes :

- un prétraitement des signaux, incluant débruitage par ondelettes, recalage et synchronisation;
- une réduction de la taille des signaux par compression dans une base d'ondelettes commune :
- l'extraction des variables utiles au moyen d'une stratégie pas à pas procédant par des applications successives de la méthode CART.

Détaillons successivement chacune de ces trois phases.

3.1 Prétraitement des signaux

Les données $X_i^j = \{X_i^j(t)\}_{t \in T_i}$ sont prétraitées de façon d'une part, à les débruiter individuellement c'est-à-dire pour un essai et une variable fonctionnelle donnés et, d'autre part, à les rendre plus homogènes au moyen de recalages.

3.1.1 Tronquer les signaux

Avant ces deux traitements, on isole une phase qui est la seule à être directement déduite de connaissances externes propres au problème. En effet, en dépit de consignes clairement définies, les durées d'enregistrement et les dates des différentes étapes de l'essai ne sont pas synchrones. Néanmoins, on peut définir deux événements à réaligner : le "vrai" début de l'essai et sa "vraie" fin qui sont lisibles au travers des variables fonctionnelles 8 et 21. Ces deux événements correspondent physiquement au démarrage réel du véhicule et à la définition de la fin de l'essai.

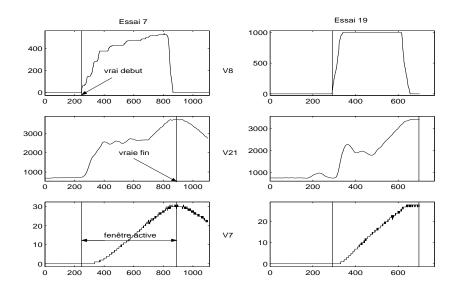


FIGURE 2 – Pour les essais 7 et 19, les trois variables fonctionnelles X^j correspondant à j=8,21,7 notées simplement V8, V21 et V7 sur le graphique. Les deux premières servent de marqueur au "vrai" début de l'essai et sa "vraie" fin, respectivement. La période utile de l'essai est visualisée sur les graphes de la variable fonctionnelle 7 par la portion de signal située entre les deux instants matérialisés par des lignes verticales.

On trouve dans la Figure 2, trois variables fonctionnelles X^j correspondant à j=8,21,7 pour les essais 7 et 19. Les deux premières servent de marqueur du "vrai" début de l'essai et de sa "vraie" fin, respectivement. La période utile de l'essai est visualisée sur

les graphes de la variable fonctionnelle 7 par la portion de signal située entre les deux instants matérialisés par des lignes verticales. Bien sûr, ces instants varient en fonction de l'essai.

Pour l'essai i, on note \widetilde{T}_i la grille T_i convenablement tronquée aux extrémités.

3.1.2 Débruiter les signaux

A i et j fixés, le signal mesuré est contaminé par un bruit de capteur. Bien sûr, il convient de l'éliminer avant tout traitement de type recalage ou interpolation des données, qui conduirait à les modifier et donc altérer la nature stochastique du bruit qui affecte le signal utile. Comme l'atteste la Figure 1, la régularité locale de celui-ci peut beaucoup varier au cours du temps, il convient donc d'utiliser des techniques de débruitage adaptatives en espace. C'est le cas de celles basées sur les méthodes d'ondelettes (cf. Donoho, Johnstone [12] pour l'un des articles fondateurs, Vidakovic [30] pour un large tour d'horizon de ces méthodes et Misiti $et\ al.\ [24]$ pour une introduction aisée).

On considère le modèle suivant, usuel en traitement statistique du signal et réaliste dans cette application :

$$\forall t \in \widetilde{T}_i, \quad X_i^j(t) = f_i^j(t) + \eta_i^j(t)$$

où $\{\eta_i^j(t)\}_{t\in \widetilde{T}_i}$ est un bruit blanc. Dans ce cadre, le débruitage consiste à décomposer le signal dans une base d'ondelettes, à seuiller les coefficients de détail de façon à éliminer essentiellement ceux attribuables au bruit puis à reconstruire un signal débruité constitué de la somme d'une approximation lisse et de détails à diverses échelles correspondant aux fluctuations rapides du signal utile.

On obtient ainsi une estimation $\{\hat{f}_i^j(t)\}_{t\in \widetilde{T}_i}$, ou encore un signal débruité $\{\hat{X}_i^j(t)\}_{t\in \widetilde{T}_i}$. La Figure 3 présente les résultats obtenus après débruitage par ondelettes des quatre variables fonctionnelles montrées en Figure 1. La méthode utilise l'ondelette de Daubechies presque symétrique d'ordre 4, un niveau de décomposition entre 3 et 5 (suivant les signaux) et le seuillage dit "universel" (cf. Donoho et Johnstone [12]).

Comme on peut le remarquer, le débruitage par ondelettes permet de supprimer de façon satisfaisante le bruit tout en préservant les composantes à haute fréquence du signal utile.

3.1.3 Synchroniser et normaliser les signaux

L'objectif de cette étape est d'éliminer la dépendance en i de la grille temporelle. On procède pour chaque signal, tout d'abord à un recalage linéaire en temps en ramenant la grille \widetilde{T}_i sur l'intervalle [0,1]. Puis, on effectue une interpolation linéaire du signal, suivie d'un échantillonnage pour se ramener à la grille régulière à m points de [0,1] (ici on fixe m=512, valeur largement suffisante pour des durées de fenêtres actives comprises entre

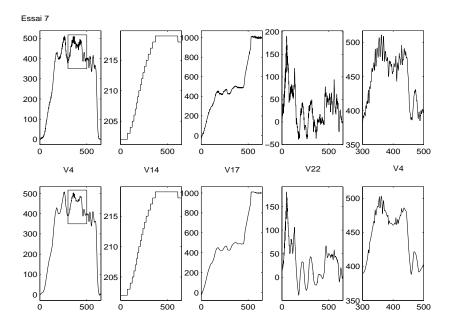


FIGURE 3 — Pour l'essai 7, en haut de la figure les quatre signaux $X_7^j(t)$ (j=4,14,17,22) et, en bas, leurs versions débruitées. Dans les deux derniers graphiques à droite, un zoom sur une portion du premier signal permet d'apprécier la qualité du débruitage par ondelettes, à la fois efficace pour débruiter les parties lisses tout en préservant les composantes à haute fréquence du signal utile.

300 et 700 observations). Un instant dans cette nouvelle "unité" de temps s'interprète comme la proportion de la durée de l'essai écoulée. On dispose donc de $\{\widetilde{X}_i^j(t)\}_{t\in T}$, sur la grille fixe $T=\{\frac{1}{m},...,\frac{m-1}{m},1\}$.

Enfin, pour éliminer certains effets d'échelle, en partie liés aux conditions de roulage, les signaux sont normalisés en ordonnée.

Remarque 2

Un autre prétraitement consiste à effectuer un recalage non linéaire en alignant pour tout j, les n signaux à l'aide de marqueurs convenablement choisis (cf. Bigot [6]). Ceci amènerait à considérer le problème plus sous un aspect de classification de formes. Cependant, cela serait extrêmement lourd et engendrerait une difficulté quant à la remontée dans le temps d'origine en particularisant de nouveau les variables fonctionnelles, et limiterait l'interprétation.

En revanche, cela permettrait de poursuivre un objectif plus ambitieux consistant à aug-

menter l'homogénéité à Y fixé, en mettant au point le recalage pour chaque modalité de la réponse.

Mentionnons que des méthodes de recalage temporel intermédiaires entre la solution adoptée et celle-ci sont envisageables, comme par exemple le type de méthode de recalage décrit dans [25] qui cherche à rapprocher des fonctions de leur moyenne.

Remarque 3

De manière implicite, dans la suite du travail (mais aussi dans les travaux antérieurs menés dans ce contexte par Renault), les essais sont considérés comme des réplications indépendantes. Des classifications non supervisées et des ACP fonctionnelles (cf. Ramsay, Silverman [25]) permettent de corroborer raisonnablement l'idée que les effets dus au pilote et aux conditions de roulage sont négligeables devant les autres facteurs de variabilité.

3.2 Compression des signaux

A l'issue de la phase de prétraitement, on dispose donc pour chaque essai, de J=21 signaux débruités, de m=512 points. Chacun de ces signaux peut donc être représenté dans une base d'ondelettes ou de paquets d'ondelettes par très peu de coefficients (cf. Mallat [23] et Coifman, Wickerhauser [9]). Il suffit, par exemple, pour un signal donné, de sélectionner les coefficients les plus grands en valeur absolue, exploitant ainsi la capacité des ondelettes à concentrer l'énergie d'un signal (pour des classes très larges de signaux), en un très petit nombre de ses grands coefficients d'ondelettes.

Le problème est ici de choisir, variable fonctionnelle par variable fonctionnelle, une base commune à tous les essais pour les représenter de façon compacte. Pour déterminer une base commune de décomposition, on peut se restreindre à un petit nombre de bases différentes comme les espaces d'approximation en ondelettes de résolution de plus en plus grossière. Comme $512 = 2^9$, seule une demie douzaine de bases, l'ondelette étant choisie (ici on utilise l'ondelette de Daubechies presque symétrique d'ordre 4), sont à mettre en compétition. Le choix peut être :

• effectué indépendamment de la variable Y et guidé par la définition d'un critère de qualité comme par exemple la moyenne de l'erreur d'approximation du signal par sa projection convenablement pénalisé.

Afin de déterminer le niveau de décomposition de chacun des signaux j, on considère le critère $EQ_j(p)$ lié à l'énergie et défini comme suit :

– pour une variable fonctionnelle j et pour un individu i, soit $X_i^j(t)$ le signal d'origine et $A_{i,p}^j(t)$ le signal reconstruit à partir des coefficients d'approximation du niveau p;

- on définit l'erreur de la variable fonctionnelle j par

$$EQ_j(p) = \sum_{i=1}^{114} ||X_i^j(t) - A_{i,p}^j(t)||^2$$

Remarque 4

Notons que, lorsque le niveau de décomposition p augmente, le nombre de coefficients et la qualité d'approximation diminuent. Le choix du niveau de décomposition résulte d'un compromis entre le nombre de coefficients retenus et la qualité d'approximation.

Le choix du niveau de décomposition de la variable j consiste alors à déterminer la plus petite valeur de p pour laquelle on détecte un changement de pente "suffisant" dans le graphe de $(p, EQ_j(p))_{1 \le p \le 9}$ et à ôter 1 à titre conservatoire.

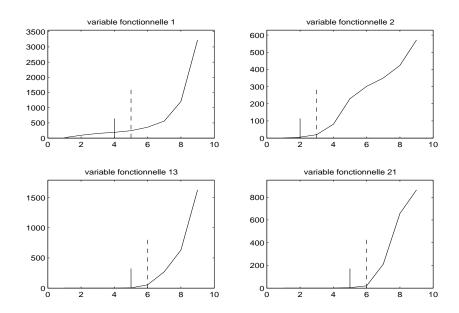


FIGURE 4 — Pour les variables fonctionnelles 1,2,13 et 21, on représente $(p,EQ(p))_{1\leq p\leq 9}$ en trait plein, la plus petite valeur de p pour laquelle on détecte un changement de pente "suffisant" en traits pointillés et cette valeur ôtée de 1 en traits pleins.

La Figure 4 esquisse la façon dont le niveau de décomposition lors de la compression par ondelettes est déterminé pour chacun des signaux.

• basé sur un critère dépendant de la variable Y, comme par exemple l'erreur de classification d'un arbre CART (voir paragraphe suivant).

L'emploi d'une procédure inspirée du premier choix ci-dessus avec recherche d'une cassure dans la répartition moyenne de l'énergie, conduit à retenir majoritairement 16 coefficients et donc à réduire $\mathbb{R}^{J \times m}$ à $\mathbb{R}^{\sum m_j}$ avec $\sum m_j \approx 300$ ou 400 suivant la stratégie adoptée pour comprimer une variable fonctionnelle (d'ailleurs non discriminante) dont les fluctuations à haute fréquence sont significatives.

La Figure 5 présente pour deux variables fonctionnelles, les résultats obtenus après compression par ondelettes : le signal après compression superposé au signal prétraité est représenté dans le premier graphique, le second (en dessous) contient les coefficients d'approximation associés. Ceux-ci peuvent, bien sûr, être de taille différente puisque le niveau de décomposition retenu dépend de la variable considérée.

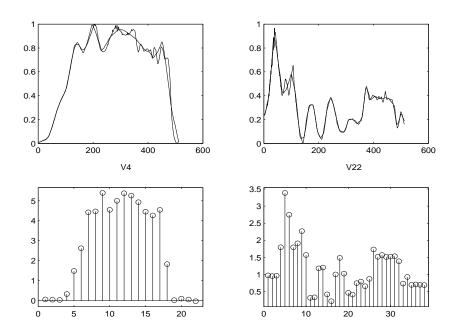


FIGURE 5 — Pour l'essai 7 et pour les deux variables correspondant à j=4,22: en haut, le signal après compression superposé au signal original (prétraité), en bas les coefficients d'approximation associés.

Les deux graphiques du haut de la Figure 5 contiennent, pour l'essai 7 et pour deux variables fonctionnelles différentes, le signal après compression superposé au signal d'origine.

Ils sont très proches bien que représentés par peu de coefficients. En effet, les deux graphiques du bas de la figure contiennent les coefficients d'approximation associés aux représentations comprimées. Ainsi, la forme des graphiques du haut et du bas de la figure se ressemblent sauf aux extrémités de l'axe des abscisses à cause d'extra-coefficients, engendrés par les prolongements appliqués aux signaux dans les calculs des coefficients par la transformée en ondelettes discrète (voir [24]).

Remarque 5

Signalons que la connexion entre les développements sur des bases orthogonales d'ondelettes de processus stochastiques et les décompositions issues de la transformée discrète en ondelettes est donnée, par exemple, dans Amato et al. [1].

Remarque 6

Une autre approche associant plus étroitement les phases de compression et de sélection des variables discriminantes est proposée par Coifman, Saito [8]. Il s'agit de choisir une base optimale, parmi les bases associées à une décomposition en paquets d'ondelettes, en maximisant la séparation entre classes.

Elle n'est pas retenue ici, une voie médiane est empruntée : des gains massifs en compression sont obtenus même au prix d'un politique de sélection un peu conservative de façon à ne pas trop obérer la phase suivante qui fera le choix des variables les plus discriminantes. On note $C^j = (C^{j,1}, ..., C^{j,K_j})$ le paquet des K_j coefficients associés à la variable fonctionnelle X^j .

3.3 Sélection de variables par CART

A la fin de l'étape précédente, il y a une réduction de la dimension de l'espace des variables, mais elle demeure insuffisante puisque l'on dispose de 114 individus à comparer à 300 ou 400 variables.

Les nouvelles données ainsi construites sont donc : $(((C_i^{j,k})_{1 \le k \le K_i})_{1 \le j \le J}, Y_i)_{1 \le i \le n}$.

On propose une procédure pas à pas basée sur la méthode CART. Celle-ci permet d'ajuster aux données, un modèle additif du type $Y = F((C^{j,k})_{j,k})$ où F est additive et plus précisément constante sur des polyèdres dont les côtés sont parallèles aux axes, sous la forme d'un arbre dyadique de décision. On peut se reporter au livre de Breiman et al. [7] les fondateurs de la méthode ou Hastie et al. [21] pour un rapide aperçu. Dans la suite, on considère l'erreur de classification définie comme usuellement mais en pénalisant les fausses classifications par le truchement de la matrice de coût définie par $\Gamma(k, k') = |k-k'|$, définition qui découle naturellement du fait que Y est une variable ordinale discrète.

La procédure est présentée ci-dessous en cinq phases :

1. Pour chaque j, on construit l'arbre CART A^j expliquant Y par le paquet de coefficients C^j et on sélectionne, au moyen de l'importance des variables au sens de Breiman $et\ al.\ [7]$ (voir aussi [19] et [18]), le paquet des coefficients utiles, noté \tilde{C}^j , en seuillant l'importance comme illustré dans la Figure 6.

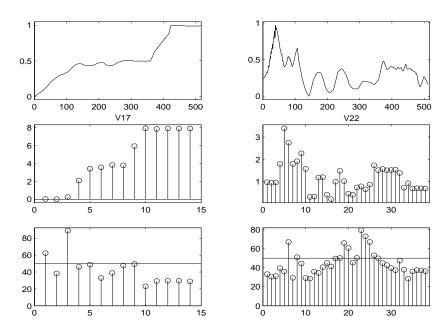


FIGURE 6 — Pour les essais 7 et 19, et pour les variables correspondant à j=17,22, en haut les signaux prétraités, au milieu le paquet C^j des coefficients d'approximation de niveau retenu et en bas l'importance de chacun de ces coefficients. Les coefficients utiles constituant \tilde{C}^j sont ceux dont l'importance dépasse le seuil.

On peut noter que les pics dans les graphes de l'importance des variables correspondent non pas seulement, à des marqueurs significatifs de la forme du signal mais bien à des événements significatifs discriminants.

- 2. On en déduit un ordre sur les "nouvelles" variables fonctionnelles (c'est-à-dire sur les paquets $(\tilde{C}^j)_j$) au moyen de l'erreur de classification, évaluée par validation croisée, commise par l'arbre A^j (voir Figure 7).
- 3. On construit une suite ascendante $(M^j)_j$ d'au plus J=21 modèles CART emboîtés, en invoquant et en testant les paquets de variables \tilde{C}^j , pas à pas, suivant l'ordre précédemment obtenu. Autrement dit, M^j explique Y par l'ensemble de paquets de coefficients $(\tilde{C}^l)_{l\leq j}$ privés des paquets qui se sont révélés, après test, comme insuffisamment informatifs.

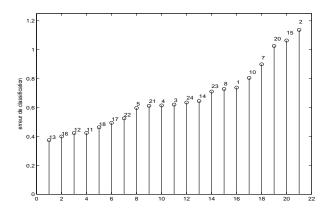


FIGURE 7 — L'erreur de classification évaluée par validation croisée des arbres A^j , de la meilleure à la pire. Elle fluctue dans un rapport de 1 à 3. Cet ordre sur les "nouvelles" variables fonctionnelles est celui qui sera utilisé pour les invoquer pas à pas.

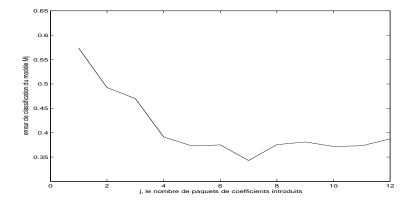


FIGURE 8 — L'erreur de classification du modèle M^j évaluée par validation croisée, en fonction de j, le nombre de paquets de coefficients introduits.

- 4. On sélectionne ensuite les variables fonctionnelles pertinentes en choisissant celles définissant le modèle M^{j_0} minimisant l'erreur de classification. L'allure de celle-ci (cf. Figure 8) est attendue : elle décroît d'abord fortement avant de lentement croître lorsque les variables introduites n'apportent plus rien à la discrimination.
- 5. Enfin, en calculant l'importance des variables explicatives du modèle M^{j_0} : les coefficients $\{\tilde{C}^j, j \in M^{j_0}\}$ et en retenant la tête de ce classement, on sélectionne les

critères pertinents (voir Figure 9).

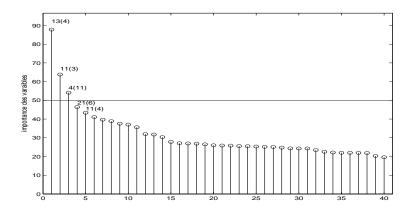


FIGURE 9 – Importance des variables calculée sur le modèle M^{j_0} sélectionné précédemment et sélection finale des trois critères dont les importances ressortent nettement en tête.

Une première façon de procéder, très dépendante du problème, consiste à ne retenir que les 5 premières variables, 5 étant le nombre souhaité de critères. On obtient alors un arbre dont l'erreur de validation croisée est de 24 sur 114 pour 12 erreurs apparentes (c'est-à-dire l'erreur de resubstitution).

Une alternative consiste à considérer l'erreur de validation croisée sur la suite de modèles emboîtés induite par l'ordre issu du calcul de l'importance des variables. On sélectionne alors le modèle dont l'erreur est la plus faible.

nombre de variables sélectionnées	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
erreur apparente	35	15	41	12	11	11	13	9	13	9	8	8	12	7
validation croisée	47	40	30	24	29	27	21	19	25	21	17	19	21	21

Table 1 – Nombre d'erreurs commises sur l'échantillon d'apprentissage en fonction du nombre de variables retenues.

La Table 1 donne, pour les modèles de cette suite dont le nombre de variables est inférieur à 15, l'erreur apparente et l'erreur de validation croisée. Le meilleur modèle est celui comportant 12 variables. L'erreur commise est de 17 sur 114 (15%) et l'erreur apparente

de 8 sur 114 (7%), ce qui est très satisfaisant.

Enfin, si l'on examine l'arbre CART construit en se restreignant à ces 12 variables (cf. Figure 10), il est intéressant de noter que 5 variables seulement étiquettent les nœuds de l'arbre et 4 d'entre elles sont en tête du classement fourni par la Figure 9.

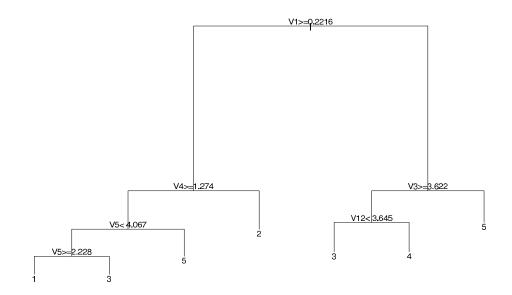


FIGURE 10 – Arbre dont l'erreur de classification, évaluée par validation croisée, est la plus faible.

Remarque 7

Terminons par une remarque générale dont la portée méthodologique est cruciale. Un inconvénient classique de l'usage des arbres de classification est leur instabilité, c'est-à-dire que le classifieur construit peut fluctuer "beaucoup" pour des "petites" variations de l'échantillon d'apprentissage (cf. Hastie et al. [21]). Un remède désormais classique à cette propriété indésirable est d'utiliser le bagging qui permet de stabiliser la prédiction en utilisant non pas un classifieur mais l'agrégé d'un ensemble de classifieurs construits par rééchantillonnage bootstrap de l'échantillon d'apprentissage (voir Ghattas [18]).

Suivant cette idée (voir Ghattas [19]), l'importance des variables et l'erreur de classification sont évaluées par rééchantillonnage. Plus précisément, pour la phase 1, on considère la moyenne des importances des variables calculées sur des arbres obtenus par rééchantillonnage n pour n, des 114 observations. Pour l'estimation de l'erreur de classification, elle est évaluée par validation croisée grâce à un schéma de découpage en 10 de l'échantillon puis stabilisée en randomisant cette phase de découpage.

4 Conclusion

Du point de vue de l'application, les critères qui ressortent comme les plus discriminants sont associés à quatre variables fonctionnelles. Parmi eux, deux sont très proches des critères obtenus par la méthode basée sur la méthode discriminante linéaire et deux sont nouveaux et considérés par les experts comme intéressants. Il faut noter que dans notre cas, ces critères ont été obtenus sans intégrer de connaissances a priori, sauf dans la phase de troncature de la grille temporelle des observations. Signalons cependant que les conditions d'arrêt dépendent de seuils fixés pour le moment en fonction de l'application.

Complémentairement à ce travail, des avancées concernent l'étude théorique de pénalités adéquates pour faire de la sélection de variables dans des contextes voisins (cf. Sauvé, Tuleau [28]). Typiquement il s'agit d'utiliser une approche par sélection de modèle "à la Birgé-Massart" (cf. Barron, Birgé, Massart [3]) pour sélectionner des variables dans un modèle de régression non linéaire, au moyen d'applications répétées de la méthode CART. Des résultats de type inégalités oracles permettent de préciser la forme des pénalités convenables et peuvent suggérer des alternatives au choix ad-hoc effectués ici.

Remerciements

Les auteurs remercient la Direction de la Recherche de Renault d'avoir mis à leur disposition les données relatives aux essais qui motivent ce travail et, en particulier, Nadine Ansaldi pour les discussions associées. Cette collaboration se poursuit actuellement dans le cadre d'un contrat de recherche entre le laboratoire de mathématiques d'Orsay et la Direction de la Recherche de Renault.

En outre, les auteurs remercient les deux rapporteurs anonymes de leurs remarques et suggestions qui ont contribué grandement à clarifier et améliorer la première version du manuscrit.

Références

- [1] U. Amato, A. Antoniadis, and I. De Feis. Dimension reduction in functional regression with applications. to appear in Comp. Stat. and Data. Anal., 2005.
- [2] N. Ansaldi. Contributions des méthodes statistiques à la quantification de l'agrément de conduite. PhD thesis, Marne-la-Vallée, 2002.
- [3] A.R. Barron, L. Birgé, and P. Massart. Risk bounds for model selection via penalization. *Probability Theory and Related Fields*, 113:301–413, 1999.

- [4] P. Besse and H. Cardot. Modélisation statistique de données fonctionnelles. In G. Govaert, editor, Analyse de données. Hermes, 2003.
- [5] G. Biau, F. Bunea, and M. Wegkamp. Functional classification in Hilbert spaces. *IEEE Trans. Inf. Theory*, 51(6):2163–2172, 2005.
- [6] J. Bigot. Recalage des signaux et analyse de la variance fonctionnelle par ondelettes; application au domaine biomédical. PhD thesis, Grenoble, 2003.
- [7] L. Breiman, J. Friedman, R. Olshen, and C. Stone. *Classification And Regression Trees*. Chapman et Hall, 1984.
- [8] R. Coifman and N. Saito. Constructions of local orthonormal bases for classification and regression. C. R. Acad. Sci. Paris, 319(Ser. 1):191–196, 1994.
- [9] R. Coifman and M. Wickerhauser. Entropy-based algorithms for best basis selection. *IEEE Trans. Inform. Theory*, 38(2):713–719, 1992.
- [10] J. Dauxois and A. Pousse. Les analyses factorielles en calcul des probabilités et en statistique : essai d'étude synthétique. PhD thesis, Université Toulouse III, 1976.
- [11] J.C. Deville. Méthodes statistiques et numériques de l'analyse harmonique. *Annales de l'Insee*, 15:7–97, 1974.
- [12] D. Donoho and I. Johnstone. Ideal spatial adaptation by wavelet shrinkage. *Biometrika*, 81(3):425–455, 1994.
- [13] S. Dudoit, J. Fridlyand, and T. Speed. Comparison of discrimination methods for the classification of tumors using gene expression data. *Journal of the American* Statistical Association, 97(457):77–87, 2002.
- [14] C. Favre. Ananlyse en normes L¹ et L⁰ des distances et des préférences. Planification en analyse sensorielle. Application au confort d'accueil de sièges automobiles. PhD thesis, Université de Rennes II, 1999.
- [15] F. Ferraty and P. Vieu. Curves discrimination: a nonparametric functional approach. Computational Statistics and Data Analysis, 44(1-2):161–173, 2003.
- [16] L. Ferré and N. Villa. Discrimination de courbes par régression inverse fonctionnelle. Revue de Statistique Aplliquée, LIII(1):39–57, 2005.
- [17] L. Ferré and A.F. Yao. Functional sliced inverse regression analysis. *Statistics*, 37(6):475–488, 2003.
- [18] B. Ghattas. Agrégation d'arbres de classification. Revue de Statistique Appliquée, XLVIII(2):85–98, 1999.

- [19] B. Ghattas. Importance des variables dans les méthodes CART. Revue de Modulad, 24:29–39, 1999.
- [20] T. Hastie, A. Buja, and R. Tibshirani. Penalized discriminant analysis. Annals of Statistics, 23:73–102, 1995.
- [21] T. Hastie, R. Tibshirani, and J. Friedman. *The Elements of Statistical Learning*. Springer, 2001.
- [22] S. Leurgans, R. Moyeed, and B. Silverman. Canonical correlation analysis when the data are curves. *Journal of the Royal Statistical Society Series B*, 55:725–740, 1993.
- [23] S. Mallat. A wavelet tour of signal processing. Academic Press, 1998.
- [24] M. Misiti, Y. Misiti, G. Oppenheim, and J-M. Poggi. Les ondelettes et leurs applications. Hermes, 2003.
- [25] J. Ramsay and B. Silverman. Functional Data Analysis. Springer, 1997.
- [26] J. Ramsay and B. Silverman. Applied Functional Data Analysis. Springer, 2002.
- [27] F. Rossi and B. Conan-Guez. Functional multi-layer perceptron: a non-linear tool for functional data analysis. *Neural networks*, 18(1):45–60, 2005.
- [28] M. Sauvé and C. Tuleau. Variable selection using CART. *Preprint Université Paris XI Orsay*, pages 1–30, 2005. en préparation.
- [29] M. Vannucci, P.J. Brown, and T. Fearn. A decision theoretical approach to wavelet regression on curves with a high number of regressors. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 112:195–212, 2003.
- [30] B. Vidakovic. Statistical modeling by wavelets. Wiley, 1999.